



⑮ BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

⑫ **Offenlegungsschrift**
⑩ **DE 196 03 377 A 1**

⑤① Int. Cl.⁶:
C 07 D 487/22
// (C07D 487/22,
235:00,257:00)C02F
1/58

⑳ Aktenzeichen: 196 03 377.2
㉔ Anmeldetag: 31. 1. 96
㉕ Offenlegungstag: 7. 8. 97

DE 196 03 377 A 1

㉚ Anmelder:
Deutsches Textilforschungszentrum Nord-West e.V.,
47798 Krefeld, DE

㉜ Vertreter:
Patentanwälte von Kreisler, Selting, Werner et col.,
50667 Köln

㉚ Erfinder:
Buschmann, Hans-Jürgen, Dr., 47807 Krefeld, DE;
Fink, Harald, 47798 Krefeld, DE; Schollmeyer,
Eckhard, Prof. Dr., 47906 Kempen, DE

⑤④ Verfahren zur Herstellung von Cucurbituril

⑤⑦ Verfahren zur Herstellung von Cucurbituril ausgehend von Acetylendiharnstoff durch Lösen von Acetylendiharnstoff in wäßriger Lösung einer starken Mineralsäure in Gegenwart eines Überschusses an Formaldehyd durch Erwärmung, vollständiges Entfernen des Wassers durch Abdampfen, und durch Umsetzen der verbleibenden Polymerlösung durch Erhitzen zu Cucurbituril in Form eines Kristallbreis.

DE 196 03 377 A 1

Beschreibung

Die Erfindung betrifft ein Verfahren zur synthetischen Herstellung von Cucurbituril.

Cucurbituril wurde erstmals 1905 in einem Aufsatz (R. Behrend, E. Meyer und F. Rusche: Über Condensationsprodukte aus Glycoluril und Formaldehyd, Justus Liebig's Ann. Chem. 339 (1905), S. 1—37) beschrieben. Zur damaligen Zeit war die makrocyclische Struktur der Verbindung nicht bekannt.

Die Struktur der makrocyclischen Verbindung wurde erstmals in der Veröffentlichung W.A. Freeman, W.L. Mock und N.-Y. Shih: Cucurbituril, J. Am. Chem. Soc. 103 (1981), S. 7367—7368 publiziert. In dieser Publikation wird auch erstmals der Name Cucurbituril für die Verbindung vorgeschlagen.

Mit den Kristallstrukturen verschiedener Komplexe von Cucurbituril befaßt sich die Veröffentlichung: W.A. Freeman, Structures of the p-Xylylenediammonium Chloride and Calcium Hydrogensulfate Adducts of the Cavitand "Cucurbituril, C₃₆H₃₂N₄O₆, Acta Cryst. B40 (1984), S.382—387.

Die Synthese der Verbindung Cucurbituril wird in allen vorgenannten Veröffentlichungen entsprechend der Vorschrift aus dem Jahre 1905 in drei Stufen durchgeführt:

1. Stufe: Synthese von Glykoluril

Zu 100 g Glyoxallösung (40%ig) werden 17,5 ml konzentrierte Salzsäure, 200 ml Wasser und 120 g Harnstoff gegeben und anschließend erhitzt. Dann wird die Lösung mindestens 5 Minuten gekocht. Es bildet sich ein weißer bis gelber Niederschlag. Nach dem Abkühlen wird der Niederschlag (Glykoluril) abfiltriert und mit etwas Wasser gewaschen und getrocknet. Ausbeute: ca. 130 g.

2. Stufe: Synthese von Behrends Polymer

Eine Mischung aus 20 g Glykoluril, 35 ml 37—40%ige Formaldehydlösung, 70 ml konzentrierte Salzsäurelösung und 100 ml Wasser wird schnell erhitzt bis zum Kochen. Die Lösung wird solange gekocht, bis sich eine klare dünne Maut auf der Oberfläche bildet. Das heiße Reaktionsgemisch wird anschließend in 500 ml kaltes Wasser eingerührt. Es bildet sich ein weißer amorpher Niederschlag, den man absetzen läßt. Die überstehende klare Lösung wird abdekantiert. Der Niederschlag wird filtriert und mit Wasser, danach mit Ethanol und schließlich mit Diethylether gewaschen. Der Niederschlag wird bei 100°C bis zur Gewichtskonstanz (wasserfrei) eventuell unter Vakuum getrocknet. Ausbeute: ca. 22 g.

3. Stufe: Synthese von Cucurbituril

Zu 14 g fein pulverisiertem Behrends Polymer werden 30 ml konzentrierte Schwefelsäure gegeben. Die Mischung wird unter Rühren bei 120—130°C mindestens 20 min erhitzt. Die Reaktion ist dann abgeschlossen, wenn eine kleine Probe der Lösung beim Verdünnen mit Wasser keinen oder nur wenig Niederschlag ergibt. Man läßt die Lösung auf Raumtemperatur abkühlen. Anschließend wird sie vorsichtig unter Rühren in 300 ml kaltes Wasser gegeben und sofort filtriert. Das klare Filtrat wird 5 min aufgekocht und über Nacht bei Raumtemperatur stehengelassen, damit sich möglichst viel Niederschlag bildet. Der Niederschlag (Cucurbitu-

ril) wird abfiltriert mit etwas Wasser gewaschen und getrocknet. Ausbeute: ca. 5 g Cucurbituril.

Der Nachteil dieser dreistufigen Synthese besteht darin, daß sie industriell nur sehr schwierig realisiert werden kann. Die zweite Stufe kann heute in der vorgeschriebenen Weise nicht durchgeführt werden, da der gleichzeitige Einsatz von Salzsäure und Formaldehyd zu karzinogenen Nebenprodukten führen kann. Auch die Isolation und Trocknung der Reaktionsprodukte (Behrend's Polymer) ist technisch sehr aufwendig.

Die Isolierung von Behrend's Polymer und dessen separate Umsetzung zu Cucurbituril nach dem Stand der Technik führt zu höheren Einsatzmengen an Chemikalien und zu geringeren Ausbeuten.

Ausgehend von diesem Stand der Technik liegt der Erfindung die Aufgabe zugrunde, ein Verfahren zur synthetischen Herstellung von Cucurbituril anzugeben, mit dem eine hohe Ausbeute mit einer großen Verfahrenssicherheit erzielbar ist.

Zur Lösung dieser Aufgabe dienen die Merkmale des Anspruchs 1.

Die Erfindung sieht in vorteilhafter Weise vor, Acetylendiharnstoff (Glycoluril) in wäßriger Lösung einer starken Mineralsäure in Gegenwart eines Überschusses an Formaldehyd durch Erwärmung zu lösen und durch Verkochen des Wassers zur Reaktion zu Behrend's Polymer zu bringen. Das Wasser wird ohne weitere Zwischenschritte vollständig durch Abdampfen entfernt und die verbleibende Polymerlösung durch Erhitzen zu Cucurbituril umgesetzt.

Ausgehend vom Acetylendiharnstoff, dem Monomerenbaustein von Cucurbituril, wird Cucurbituril in einer Stufe synthetisiert. Durch Verdampfen des Lösungsmittels Wasser, werden die Reaktionsbedingungen für die Synthese von Cucurbituril nacheinander durchlaufen. Dadurch entfällt die Isolation der Zwischenprodukte und die Ausbeute wird deutlich größer. So beträgt die Ausbeute an Cucurbituril bei der neuen Synthese ca. 80—85% der theoretisch maximalen Ausbeute bezogen auf Acetylendiharnstoff. Im Vergleich zu der eingangs genannten Synthese mit einem Ausbeutegrad zwischen 40 und 70% ist somit nicht nur die Ausbeute erheblich erhöht worden, sondern darüber hinaus auch die Schwankungsbreite der Ausbeute verringert worden.

Da Cucurbituril in der Reinigung farbiger Abwässer technisch eingesetzt werden kann, kommt einer wirtschaftlicheren Synthese dieser Verbindung eine große Bedeutung zu.

Der entstandene Kristallbrei wird nach Kühlung in kaltes Wasser eingebracht, wobei das Cucurbituril, nachdem es kurzzeitig in Lösung gegangen ist, als schwerer, feinkristalliner Niederschlag ausfällt.

Die Ausbeute kann in vorteilhafter Weise durch kurzzeitiges Aufkochen oder durch längeres Stehenlassen, z. B. für eine Zeitspanne zwischen einer 1/2 Stunde und 2 Tagen, noch gesteigert werden.

Weitere vorteilhafte Merkmale der Erfindung sind den weiteren Unteransprüchen zu entnehmen.

Die Synthese von Cucurbituril wird nachstehend im einzelnen beschrieben:

Acetylendiharnstoff ist im Handel erhältlich, oder kann leicht aus Glyoxal und Harnstoff säurekatalysiert dargestellt werden.

Acetylendiharnstoff wird in wäßriger Schwefelsäure mit einem Überschuß an Formaldehyd durch Erwärmung gelöst, und durch Verkochen des Wassers zur Reaktion zu Behrend's Polymer gebracht. Das Wasser wird ohne weitere Zwischenschritte vollständig durch

Abdampfen entfernt, und die verbleibende Polymerlösung durch Erhitzen zu Cucurbituril unter Formaldehydabspaltung umgesetzt.

Die Menge der einzusetzenden konzentrierten Schwefelsäure wird hauptsächlich durch die Handhabbarkeit bestimmt. Ist sie zu klein, ist im ungünstigsten Fall die Umsetzung des Polymeren zu Cucurbituril nicht vollständig, so daß das erhaltene Cucurbituril mit hohen Anteilen an Polymeren und Oligomeren verunreinigt ist. Ist sie zu groß, verringert sich die Ausbeute entsprechend, da die Löslichkeit von Cucurbituril von der Säurekonzentration abhängig ist, und bei der weiter unten aufgeführten Fällung entsprechende Anteile im Filtrat gelöst bleiben. Es ist ferner zu beachten, daß die Viskosität des erkalteten Kristallbreis wesentlich von der Menge der eingesetzten konzentrierten Schwefelsäure abhängt.

Die Menge des einzusetzenden "Reaktionswassers" beeinflusst wesentlich die Bildung von Behrend's Polymer in der Weise, daß die Ausbeute um so höher ausfällt, je mehr Wasser für die Polymerisation eingesetzt wird. Die Obergrenze der Wassermenge wird durch die Wirtschaftlichkeit bestimmt, da alles eingesetzte Wasser vollständig durch Verdampfung eliminiert werden muß.

Der entstandene Kristallbrei wird nach Abkühlung in kaltes Wasser eingebracht, wobei das Cucurbituril, nachdem es kurzzeitig in Lösung gegangen ist, als schwerer, feinkristalliner Niederschlag ausfällt. Die Niederschlagsmenge richtet sich nach der Menge des "Fällungswassers", in welchem der Kristallbrei eingebracht wird, wird aber nur noch unwesentlich gesteigert, wenn die Wassermenge mehr als das Zehnfache der eingesetzten Masse an konzentrierter Schwefelsäure beträgt. Außerdem kann die Ausbeute durch kurzzeitiges Aufkochen oder durch längeres Stehenlassen noch gesteigert werden.

Der Niederschlag wird abfiltriert, mit Wasser säurefrei gewaschen und getrocknet. Liegt die Trocknungstemperatur über 100°C, so wird auch der größte Teil gebundenen Wassers abgegeben.

Die Ausbeuten können bei dieser Verfahrensweise 80% der theoretischen Ausbeute und mehr betragen.

Die Entstehung von Behrend's Polymer ist zwar mit anderen Säuren ebenso möglich, die Umsetzung zu Cucurbituril funktioniert allerdings nur mit Schwefelsäure, da diese wichtige strukturbildende Eigenschaften besitzt.

In einer Verfahrensvariante wird der Kristallbrei in der konzentrierten Schwefelsäure mit etwas Wasser verdünnt, bis er vollständig aufgelöst ist. Der Lösung werden unter heftigem Rühren ein inertes Trägermaterial, nämlich mineralische Oxide, wie z. B. Kieselgel und Aluminiumoxid, und organische Polymere zugesetzt. Danach wird durch weitere Zugabe von Wasser das Cucurbituril auf das Trägermaterial niedergeschlagen.

Beispiel

Ansatz:

15,0 g Acetyldiharnstoff
26,5 g Formaldehydlösung ca. 37%ig
26,5 g konzentrierte Schwefelsäure
0,50 g bzw. 100 g Wasser.

Das Wasser wird mit konzentrierter Schwefelsäure und Formaldehydlösung vorgelegt und der Acetyldiharnstoff unter Rühren eingestreut. Die Suspension

wird unter Rühren erhitzt, wobei der Acetyldiharnstoff vor Erreichen der Siedetemperatur vollständig in Lösung geht. Daraufhin wird das Wasser abgedampft, wobei die Lösung immer viskoser wird und gegen Ende gelblich weiß geliert, dann aber schnell in eine orangefarbene klare Lösung übergeht.

Die Lösung wird dann vorsichtig weiter erhitzt, bis bei einer Temperatur zwischen 135 und 145°C die Formaldehydabspaltung einsetzt. Bei Beginn der Formaldehydabspaltung wird sofort die Heizung abgestellt. Die Temperatur steigt dann noch von allein auf etwa 165°C. Zur Vervollständigung der Reaktion wird noch 15 Minuten gerührt und der inzwischen entstandene Kristallbrei auf Raumtemperatur heruntergekühlt.

Der Kristallbrei wird anschließend in 265 ml kaltes Wasser gegossen, worin sich dieser erst klar auflöst, jedoch sofort ein weißer kristalliner Niederschlag gebildet wird. Durch etwa 5-minütiges Aufkochen wird diese Ausfällung vervollständigt, und nach Abkühlung auf Raumtemperatur der Niederschlag abgesaugt, mit Wasser säurefrei gewaschen, und bei 130°C im Trockenschrank bis zur Gewichtskonstanz getrocknet.

Ausbeuten:

ohne Wasser: 8,89 g entspr. 50,8% der theoretischen Ausbeute
mit 50 g Wasser: 11,84 g entspr. 67,5% der theoretischen Ausbeute
mit 100 g Wasser: 14,42 entspr. 82,4% der theoretischen Ausbeute.

Patentansprüche

- Verfahren zur Herstellung von Cucurbituril ausgehend von Acetyldiharnstoff durch
 - Lösen von Acetyldiharnstoff in wäßriger Lösung einer starken Mineralsäure in Gegenwart eines Überschusses an Formaldehyd durch Erwärmung,
 - vollständiges Entfernen des Wassers durch Abdampfen, und
 - durch Umsetzen der verbleibenden Polymerlösung durch Erhitzen zu Cucurbituril in Form eines Kristallbreis.
- Verfahren nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß der Kristallbrei nach Abkühlung in kaltes Wasser eingebracht wird, wobei das Cucurbituril, nachdem es kurzzeitig in Lösung gegangen ist, als schwerer, feinkristalliner Niederschlag ausfällt.
- Verfahren nach einem der Ansprüche 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, daß die eingesetzte Wassermenge gewichtsmäßig weniger als das Zehnfache der Mineralsäuremenge beträgt.
- Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, daß die Ausbeute an Cucurbituril durch kurzzeitiges Aufkochen der Mixtur oder durch längeres Stehenlassen gesteigert wird.
- Verfahren nach einem der Ansprüche 2 bis 4, dadurch gekennzeichnet, daß der Niederschlag abfiltriert bzw. abzentrifugiert wird, mit Wasser säurefrei gewaschen und anschließend getrocknet wird.
- Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, daß für die Umsetzung von Behrend's Polymer zu Cucurbituril Schwefelsäure verwendet wird.
- Verfahren nach Anspruch 5 oder 6, dadurch ge-

kennzeichnet, daß eine Trocknungstemperatur über 100°C verwendet wird.

8. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, daß der Kristallbrei in der konzentrierten Mineralsäure mit soviel Wasser verdünnt wird, bis er vollständig aufgelöst ist, daß der daraus entstandenen Lösung unter intensivem Rühren ein inertes Trägermaterial zugesetzt wird, und daß durch weitere Zugabe von Wasser das Cucurbituril auf das Trägermaterial niedergeschlagen wird.

9. Verfahren nach Anspruch 8, dadurch gekennzeichnet, daß als Trägermaterial mineralische Oxide, wie z. B. Kieselgel oder Aluminiumoxid, und/oder organische Polymere zugesetzt werden.

10. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, daß zunächst eine Suspension aus Wasser, konzentrierter Schwefelsäure und Formaldehydlösung gebildet wird,

— daß Acetylendiharnstoff unter Rühren beigemischt wird,

— daß die Suspension solange erhitzt wird, bis der Acetylendiharnstoff vollständig in Lösung gegangen ist,

— daß das Wasser bis zur Bildung einer orange-rot gefärbten klaren Lösung abgedampft wird, daß die Lösung bis zu einer Temperatur zwischen ca. 130°C und 150°C, vorzugsweise zwischen ca. 135°C bis 145°C, erhitzt wird, wobei die Formaldehydabspaltung beginnt,

— daß die Wärmezufuhr beim Einsetzen der Formaldehydabspaltung sofort eingestellt wird,

— daß der inzwischen entstandene Kristallbrei weiter gerührt wird und bis Raumtemperatur abgekühlt wird,

— daß der Kristallbrei in kaltem Wasser unter Bildung eines weißen kristallinen Niederschlags aus Cucurbituril aufgelöst wird,

— daß dieses Präzipitieren durch Aufkochen vervollständigt wird, und

— daß der Niederschlag nach Abkühlung auf Raumtemperatur abgesaugt, säurefrei gewaschen und anschließend getrocknet wird.

11. Verfahren nach Anspruch 10, dadurch gekennzeichnet, daß das Auflösen des Kristallbreis gewichtsbezogen in einer ca. 3- bis 5-fachen, vorzugsweise 4-fachen Menge Wassers erfolgt.

12. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 11, dadurch gekennzeichnet, daß das gewichtsbezogene Mengenverhältnis von Formaldehyd in Form einer ca. 37 bis 40%igen Formaldehydlösung zu konzentrierter Schwefelsäure ca. 0,8 bis 1,2 beträgt.

13. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 12, dadurch gekennzeichnet, daß das gewichtsbezogene Mengenverhältnis von Acetylendiharnstoff zu der ca. 37 bis 40%igen Formaldehydlösung oder der konzentrierten Schwefelsäure ca. 0,45 bis 0,7 beträgt.

14. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 13, dadurch gekennzeichnet, daß das gewichtsbezogene Mengenverhältnis von Acetylendiharnstoff zu Wasser ca. 0,1 bis 0,3, vorzugsweise zwischen ca. 0,12 bis 0,2 beträgt.

15. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 14, dadurch gekennzeichnet, daß das Verdampfen des Lösungsmittels Wasser durch Destillation, Vakuumdestillation oder azeotrope Destillation erfolgt.

DE 19603377A1

The isolation of Behrend's polymer and the separate transformation of the polymer to Cucurbituril with the stand of technology lead to higher quantity of chemicals and to less yield. The mission is to invent with the stand of technology, a process for the synthetic production of Cucurbituril with huge yield and with big process security.

To solve the mission serves the marks of pretension 1.

The invention:

Acetylenediurea (Glycoluril) in aqueous solution of a strong inorganic acid in presence of excess formaldehyde to solvent with heating and synthesis Berend's polymer through evaporation of the water.

The water will be removed through evaporation, without intermediate stage, complete and the delude polymer-solvent through heating shifts to Cucurbituril. If you start with acetylenediurea, the monomeric building block of Cucurbituril, will be synthesis of Cucurbituril in one step. Through evaporation of the solvent (water), the reaction mixture run through the reaction conditions of all steps one after another. Therefore escapes the isolation of the intermediate products and the yield will be bigger. The yield is 80-85 % with the new synthesis. In comparison to the method and the beginning collect with a yield between 40 % and 70 %. Now the yield is very bigger and the fluctuation broad is smaller. Because Cucurbituril can be used technically in the cleaning of colored waste water, it has a big economic role. The arised crystal pulp are cooled and then pooled in cool water. At first the Cucurbituril solves, then it precipitates than heavy fine crystal sediment. You can step up the yield, if you cooks it short or you wait a time space, ½ hour to 2 days.

New more advantage sign of the invention.

The synthesis of Cucurbituril in separately described:

Acetylenediurea is obtainable commercially or it can be synthesized easily from glyoxal and urea, acid-catalyzed. Acetylenediurea solves in aqueous sulfuric acid with an excess of formaldehyde through heating and through evaporation of the water, it reacts to Berend's polymer. The water will be removed without intermediate stage complete through evaporated, and the remained polymer solvent through heating transformed to Cucurbituril under elimination of formaldehyde. The quantity of the used concentrated sulfuric acid is dependent of the handling. Is the quantity to small,

probable the transformation to Cucurbituril is incomplete, so that the synthesis of Cucurbituril impure with polymers and oligomer. Is the quantity of sulfuric acid to huge, the yield decrease to, because the solubility of Cucurbituril depends by the acid concentration, then it stay in filtrate. The viscosity of the crystal pulp is dependent on the acid concentration, too.

The quantity of the used "reaction water" influences only the transformation of the Berend's polymer. The more water you use, the more yield you get. The used water quantity depends by the economy efficiency, because you must eliminates all water through evaporation and heating. The arised crystal pulp are cooled and then pooled in cool water. At first the Cucurbituril solves, then it precipitates than heavy fine crystal sediment. The sediment quantity are dependent by the quantity of the "precipitate water", in which the crystal pulp solves. The increase is very small, if the water quantity are more than 10 : 1 in comparison with the sulfuric acid quantity. You can step up the yield, if you cools it short or you wait a time space (1/2 hours to 2 days). The sediment will be filtered, washed with water acid-free and dried. On the dried temperature over 100 °C, you eliminate the most bound water. With this method, you can reach the yield over 80 %.

The synthesis of the Berend's polymer is possible with other acid, but the transformation to Cucurbituril are possible only with sulfuric acid, because it owed important structure-formed property.

In a variant process:

The crystal pulp will be dilute in concentrated sulfuric acid with water until it solves completely. The solution will be under strong stirring added a inert support medium, like mineral oxide, like silica gel and aluminum oxide and organic polymers. If after that water added, the Cucurbituril sedimentate on the support medium.

L12 ANSWER 11 OF 13 CAPLUS COPYRIGHT 2002 ACS

ACCESSION NUMBER: 1997:623631 CAPLUS

DOCUMENT NUMBER: 127:205599

TITLE: Preparation of cucurbituril.

INVENTOR(S): Buschmann, Hans-Juerger; Fink, Harald; Schollmeyer, Eckhard

PATENT ASSIGNEE(S): Deutsches Textilforschungszentrum Nord-West E.V., Germany

SOURCE: Ger. Offen., 4 pp.

CODEN: GWXXBX

DOCUMENT TYPE: Patent

LANGUAGE: German

FAMILY ACC. NUM. COUNT: 1

PATENT INFORMATION:

PATENT NO.	KIND	DATE	APPLICATION NO.	DATE
DE 19603377	A1	19970807	DE 1996-19603377	19960131

OTHER SOURCE(S): CASREACT 127:205599

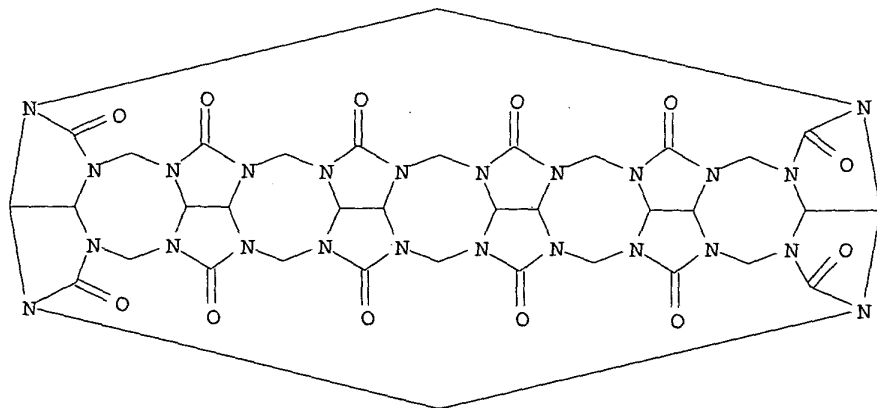
AB Cucurbituril (I) was prepd. by (1) dissoln. of acetylenediurea (II) in aq. mineral acid in the presence of excess formaldehyde under heating, (2) removal of H₂O via distn., and (3) heating the resulting polymer to give cryst. I. Thus, II was added to aq. H₂SO₄ contg. aq. formaldehyde under heating and stirring; H₂O was removed by distn. to give a residue which was heated to 135-145.degree.. Heating was discontinued when formaldehyde cleavage began, and self-heating brought the reaction temp. to 165.degree.. The mixt. was stirred a further 15 min. and the resulting crystals were cooled and added to H₂O to give 82.4% I.

IT 80262-44-8P, Cucurbituril

RL: IMF (Industrial manufacture); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(prepn. of cucurbituril)

RN 80262-44-8 CAPLUS

CN 1H,4H,14H,17H-2,16:3,15-Dimethano-5H,6H,7H,8H,9H,10H,11H,12H,13H,18H,19H,20H,21H,22H,23H,24H,25H,26H-2,3,4a,5a,6a,7a,8a,9a,10a,11a,12a,13a,15,16,17a,18a,19a,20a,21a,22a,23a,24a,25a,26a-tetracosazabispentaleno[1''',6''':5',6'',7'']cycloocta[1'',2'',3'':3',4']pentaleno[1',6':5,6,7]cycloocta[1,2,3-gh:1',2',3'-g'h']cycloocta[1,2,3-cd:5,6,7-c'd']dipentalene-1,4,6,8,10,12,14,17,19,21,23,25-dodecone, dodecahydro- (9CI) (CA INDEX NAME)



IT 496-46-8, Acetylenediurea
RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
(prepn. of cucurbituril)
RN 496-46-8 CAPLUS
CN Imidazo[4,5-d]imidazole-2,5(1H,3H)-dione, tetrahydro- (9CI) (CA INDEX
NAME)

